

# ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МНОГОМЕРНЫХ МОДЕЛЕЙ ПРИ ОБРАБОТКЕ СПЕКТРОВ В АТОМНО-ЭМИССИОННОМ АНАЛИЗЕ

Е.В. Шабанова, И.Е. Васильева  
Институт геохимии им. А.П. Виноградова СО РАН, Россия  
664033 Иркутск, Фаворского, 1А; [shev@igc.irk.ru](mailto:shev@igc.irk.ru)

Явления, лежащие в основе атомно-эмиссионного анализа (АЭА) вещества, как и большинство реальных объектов и процессов, имеют многопризнаковую природу. Общие вопросы построения математических моделей в многомерном статистическом анализе и теории информации разработаны достаточно хорошо, но применение такого подхода на практике в конкретной предметной области требует специального исследования. Кроме того, в АЭА практически не проводили систематические изучения вопросов построения и использования математических моделей с точки зрения оптимизации процессов обработки данных по критериям качества результатов анализа. В то же время, в базах данных для визуальной интерпретации спектров накоплен большой объем необходимой информации. Настоящая работа посвящена проблемам построения таблиц экспериментальных данных, испытания и сопоставления возможностей различных линейных и нелинейных  $n$ -мерных моделей, таких как традиционно используемые в количественных методиках АЭА регрессионные зависимости первого и второго порядков (МНК-1 и МНК-2); регрессия на главных компонентах (РГК); нейросеть (НС), осуществляющая нелинейную многомерную регрессию с регулируемой гладкостью. Для выбора оптимальной регрессионной модели предлагается использовать ранговый критерий.